

УПРОЩЕННЫЙ АЛГОРИТМ ПРОСТРАНСТВЕННОГО КЕШИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Дашкевич А.А., Охотская Е.В.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт», г. Харьков*

Для решения многих задач молекулярной динамики сплошных сред наиболее затратным является определение ближайших соседей в многомерных пространствах. Приближенные методы обеспечивают быстрый поиск, но приведенные в них параметры не налегают коррекции и уточнению. В работе предложен модифицированный метод пространственного кеширования для быстрого поиска ближайших соседей, в котором кэш рассчитывается следующим образом (для двумерного случая):

- 1) пространство разбивается на сетку размером $C \times C$;
- 2) для координат всех (x, y) рассчитываются индексы j – номер колонки, i – номер ряда в сетке клетки, в которой находится точка;
- 3) по заданным индексам рассчитываются значения .

Результаты работы модифицированного метода пространственного кеширования показаны на рис. 2

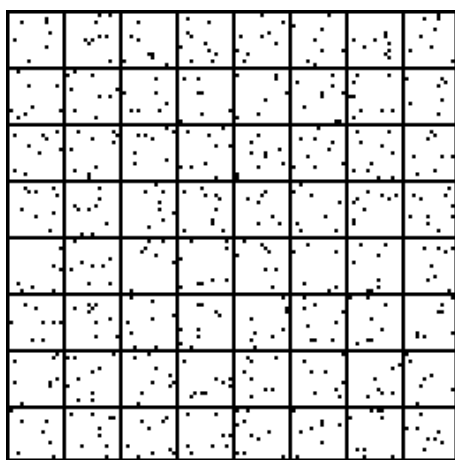


Рис. 1. Исходное множество точек

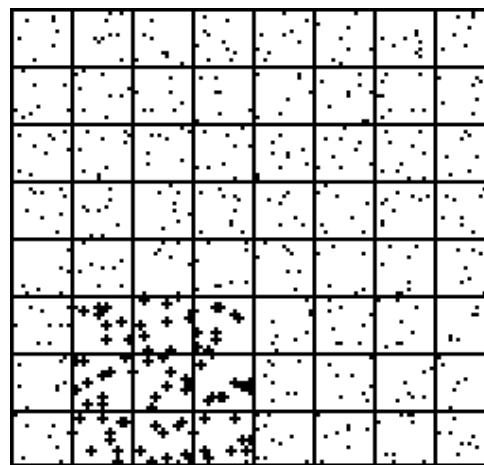


Рис. 2. Ближайшие соседи методом пространственного кеширования

Предложенный метод позволяет установить все точки, находящиеся в ближайших клетках сетки.